表面拡散と粒界拡散に基づく電子パッケージ内アルミ配線の ストレス・マイグレーション破壊の数値シミュレーション*

北村 隆行^{*1}, 大谷 隆一^{*1}, 山中 哲哉^{*2}

Numerical Simulation of Stress-Induced Failure in Aluminum Conductors of a Microelectronic Package based on Surface and Grain Boundary Diffusion

Takayuki KITAMURA, Ryuichi OHTANI and Tetsuya YAMANAKA

The stress-induced failure in an aluminum conductor of a microelectronic package was investigated in terms of diffusion along the surface and grain boundary. The mechanism of the growth of groove, which initiated at and progressed along a grain boundary perpendicular to the stress at elevated temperature, was proposed and the failure process was numerically simulated. The grooving process was found to be sensitive to thermal stress as well as the diffusion ratio, F =(grain boundary diffusion)/(surface diffusion). The active grain-boundary-diffusion brought about a crack-like groove at high magnitudes of F and/or stress, whereas the low magnitudes led to a V-shaped groove and marked thinning of the conductor.

Key Words: Numerical Analysis, Thermal Stress, Diffusion, Aluminum Conductor, LSI, Electronic Package, Stress-Induced Migration, Grain Boundary Grooving, Surface Diffusion, Grain Boundary Diffusion

1. 緒 言

電子パッケージのアルミ配線は高集積化のため細線化が追求され、線幅1 μm 以下となっている。これに伴ってストレス・マイグレーションやエレクトロ・マイグレーションと呼ばれる現象によって配線の破損・破断が発生することが知られるようになり、その防止がパッケージの信頼性確保のための重要な課題の一つとなってきた^{(1)~(8)}。図1はストレス・マイグレーションによるアルミ配線の破断の一例である。ところが、ストレス・マイグレーションは比較的最近発見された現象^{(1)~(5)}であって、その機構は明らかになっていない^{(6)~(9)}。その解明が困難な原因は、破壊過程の実験観察が困難であることに加え、現在までに研究されてきた機器部材とは異なる微小部材特有の破壊機構であるためと考えられる。

本研究では、ストレス・マイグレーションによる微視的粒界破壊機構として表面拡散と粒界拡散に基づく粒界溝成長(grain boundary grooving)を提案する。また、同機構による粒界溝成長の数値シミュレーション

を行う。

2. ストレス・マイグレーションの 破壊機構の提案

2.1 表面拡散による粒界溝の発生・成長 固体表面の拡散による原子のフラックス J_s は、次式のように表面に沿った化学ポテンシャル μ のこう配に支配される⁽¹⁰⁾。

$$J_s = -(D_s \delta_s / \Omega k T) \cdot \partial \mu / \partial s \quad \dots\dots\dots (1)$$

ここで、 D_s は表面拡散係数、 δ_s は表面拡散層の厚さ、 Ω は原子容積、 k はボルツマン定数、 T は絶対温度、 s は表面に沿った距離である。表面の化学ポテンシ

図1 ストレス・マイグレーションによるLSIパッケージ内アルミニウム配線の破断例

* 原稿受付 平成5年1月14日。

^{*1} 正員, 京都大学工学部 (〒606-01 京都市左京区吉田本町)。

^{*2} 京都大学大学院。

ルは表面形状に依存し、表面の曲率 κ の関数として

$$\mu = \mu_0 - \Omega \gamma_s \kappa \quad \dots\dots\dots (2)$$

と表される⁽¹¹⁾。ただし、 μ_0 は平面のポテンシャル、 γ_s は表面エネルギーである。すなわち、物体は曲率 κ が一定の球状になるように表面拡散が起こる。また、質量保存則とこれらの式を組合せると、表面の各位置における垂直方向相対変形速度 V_n は

$$V_n = -(D_s \delta_s / \Omega k T) \cdot \partial^2 \kappa / \partial s^2 \quad \dots\dots\dots (3)$$

と与えられる。

ここで、図2(a)に示すような表面垂直方向に粒界(破線)を有する固体表面を考える。粒界がなければ表面のいたるところで化学ポテンシャルは一定であり、表面拡散による形状変化は生じない。一方、粒界と表面の会合点では、熱動学的局所エネルギーバランスより表面は図2(b)に示すような

$$2\gamma_s \cdot \cos \psi = \gamma_b \quad \dots\dots\dots (4)$$

を満たす平衡角 ψ を形成する。なお、 γ_b は粒界自由エネルギーである。したがって、会合点近傍では曲率 κ は零ではないため、図2(b)に矢印で示すような表面拡散による原子の流れが誘起される。この流れによって粒界に沿って Thermal grooving と呼ばれる開口の大きい溝が形成される⁽¹²⁾。この場合、溝は初期には高速で成長するが、成長とともに減速されるため、かなり微小な要素といえども強度的な問題となることはない。しかし、次節に述べるように引張応力が作用する場合には成長の加速が生じるので、このような粒界溝は微小要素を破壊に導く欠陥の端緒となり得る。

2.2 応力に誘起された粒界溝成長の加速 粒界

に沿った原子の拡散は、

$$J_b = -(D_b \delta_b / \Omega k T) \cdot \partial \mu / \partial x \quad \dots\dots\dots (5)$$

に支配される⁽¹⁰⁾。ここで、 J_b はフラックス、 D_b は粒界拡散係数、 δ_b は粒界厚さ、 x は粒界に沿った距離である。化学ポテンシャル μ は垂直応力 σ に依存し、次式のように表される⁽¹³⁾。

$$\mu = \mu_0 - \Omega \sigma \quad \dots\dots\dots (6)$$

μ_0 は無負荷時のポテンシャルである。質量保存則 $\partial J_b / \partial x + \delta = 0$ は式(5)、(6)を用いて次式となる。

$$(D_b \delta_b \Omega / k T) \partial^2 \sigma / \partial x^2 + \delta = 0 \quad \dots\dots\dots (7)$$

ここで、 δ は粒界への原子の堆積速度である。ただし、粒界上に作用する応力は σ のみであって、他の応力成分は零とする。高温クリープにおける物体内部の粒界キャビティの成長は、このような応力に誘起された粒界拡散によってもたらされることが知られており、Hull と Rimmer をはじめとして数多くのキャビティ成長解析が本式に基づいて行われてきた^{(13)~(15)}。これらの解析を参考に、近似的に堆積速度 δ は粒界に沿って一様である(rigid grainの仮定)と考えることができる。

図2(c)のように粒界溝に垂直な方向に引張応力が作用する場合には、粒界拡散によって原子が溝先端から粒界方向に流出する。したがって、表面拡散に加えて粒界拡散による原子流出の重量によって粒界溝成長は加速される。ここで、粒界溝の先端における化学ポテンシャルと原子のフラックスの連続性より次の関係が得られる。

$$\sigma_o = \gamma_s \kappa_{tip} \quad \dots\dots\dots (8)$$

図2 表面拡散および粒界拡散による粒界溝形成の説明図

$$\sigma_o' = (2kT/D_b\delta_b) \cdot (\partial x/\partial s)_{\text{tip}} \dots\dots\dots (9)$$

σ_o , σ_o' , x_{tip} , $(\partial x/\partial s)_{\text{tip}}$ は, それぞれ粒界溝先端における粒界垂直応力, その x 方向(結晶粒界に沿う方向)の偏微分, 溝先端の曲率およびその表面に沿った距離 s に対する偏微分である。

表面拡散に比べて粒界拡散が活発である場合 ($D_b\delta_b/D_s\delta_s \gg 1$) には, 粒界と表面の会合点近傍原子は粒界に吸収されるため, 表面拡散による溝の開口より深さを増すほうが速い。したがって, 粒界溝は粒界に沿ったき裂状の形になると推定される。一方, 表面拡散が活発である場合 ($D_b\delta_b/D_s\delta_s \ll 1$) には, Thermal grooving と同様の開口の大きな粒界溝が形成されると考えられる。実際の粒界溝成長は, 表面拡散と粒界拡散の競合によりその形状や成長速度等が決定される。

クリープキャビティは物体内部の粒界析出物等を核に発生することが知られている⁽¹⁶⁾⁽¹⁷⁾ が, 粒界溝は表面と粒界の会合があるだけで発生する。すなわち, 粒界溝の場合には特別な核生成は不要であり, 部材が高温にさらされた瞬間に発生し, ただちに成長を開始する。微小要素はその体積に比して表面積が大きいため, 粒界溝はその破損寿命に重大な影響を及ぼすと考えられる。

(a) バンブー構造を有するアルミニウム配線のモデル (b) シミュレーションを行った配線領域と離散化の説明図

図3 アルミニウム配線モデル

3. 粒界溝成長の数値シミュレーション

粒界溝の成長は, 拡散方程式 [式(3), (7)], 粒界溝先端における条件 [式(4), (8), (9)], 外部境界条件より求められる。本章では, 差分法によりその粒界溝成長の数値シミュレーションを行う。

3.1 シミュレーション方法 図3(a)はモデル化した Bamboo 構造を有する多結晶配線を示す。この構造はエレクトロマイグレーションの抑制には効果があるが, ストレス・マイグレーションには依然として大きな問題があることが知られている⁽⁷⁾⁽⁸⁾。また, 電子パッケージ内配線には保護膜との熱膨張差により引張りの熱応力が負荷される^{(6)~(9)}。そこで, 図のように粒界は周期的に配線を横断するとし, 軸方向に引張応力 σ_∞ が負荷された二次元配線を解析対象とした。

式(7)の微分方程式を式(8), (9)および

$$d\sigma/dx=0 \quad \text{at } x=W \text{ (配線中央; 配線幅は } 2W)$$

$$W\sigma_\infty - \gamma_s \sin \psi = \int_a^W \sigma dx \dots\dots\dots (10)$$

の条件のもとで解くと, 粒界拡散による粒界溝からの原子の流出は次の溝端での曲率に関する方程式に集約することができる。

$$x_{\text{tip}} = (\sigma_\infty - \sin \psi) / (1 - a/W) / \gamma_s \\ - (2/3)(1 - a/W)F(\partial x/\partial s)_{\text{tip}} \dots\dots\dots (11)$$

ここで, F は粒界拡散と表面拡散の比(拡散比)

$$F = D_b\delta_b/D_s\delta_s \dots\dots\dots (12)$$

である。すなわち, 式(11)のもとで式(3)の表面拡散の微分方程式を解けばよいことになる。そこで, 問題の対称性を考慮して図3(b)に示す 1/4 領域の配線表面を 50~200 個の点に離散化して計算を行った。ただし, 各変数は次式によって無次元化して計算を行った。

$$\bar{t} = t(D_s\delta_s\Omega\gamma_s)/(kTW^4) \dots\dots\dots (13\cdot a)$$

$$\bar{s} = s/W \dots\dots\dots (13\cdot b)$$

$$\bar{x} = x/W \dots\dots\dots (13\cdot c)$$

$$\bar{a} = a/W \dots\dots\dots (13\cdot d)$$

$$\bar{v}_n = v_n kTW^3/(D_s\delta_s\Omega\gamma_s) \dots\dots\dots (13\cdot e)$$

$$\bar{\sigma}_\infty = \sigma_\infty W/\gamma_s \dots\dots\dots (13\cdot f)$$

シミュレーションは次の手順に従って行った。まず, 配線表面の点 i における曲率 $\bar{\kappa}_i$ を点 $i-1$, i , $i+1$ の3点の座標をとる円の半径の逆数として求める。ただし, 粒界溝先端における曲率 $\bar{\kappa}_N$ は式(11)を無次元化した次式より計算した。

$$\bar{\kappa}_N = [(\bar{\sigma}_\infty - \sin \psi) / (1 - \bar{x}_N) \\ + (2/3)(1 - \bar{x}_N) \cdot \bar{\kappa}_{N-1} / F / (\bar{s}_N - \bar{s}_{N-1})] \\ / [1 + (2/3)(1 - \bar{x}_N) / F / (\bar{s}_N - \bar{s}_{N-1})] \dots\dots (14)$$

式(3)より任意の点 i の無次元化した垂直変位速度 $\bar{v}_i$ は次式より求められる。

$$\bar{v}_i = [(\bar{x}_{i+1} - \bar{x}_i)/\bar{s}_{i+1} - (\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1})/\bar{s}_i] / [(\bar{s}_{i+1} + \bar{s}_i)/2] \quad \dots\dots\dots(15)$$

点 i の座標を $(\bar{x}_i, \bar{y}_i)$ とすると、微小時間 $\Delta\bar{t}$ 経過後の表面の座標 $(\bar{x}'_i, \bar{y}'_i)$ は、

$$(\bar{x}'_i, \bar{y}'_i) = (\bar{x}_i + \bar{v}_i \Delta\bar{t} \cdot \sin \theta_i, \bar{y}_i + \bar{v}_i \Delta\bar{t} \cdot \cos \theta_i) \quad \dots\dots\dots(16)$$

$$\tan \theta_i = -(\bar{y}_{i+1} - \bar{y}_{i-1})/(\bar{x}_{i+1} - \bar{x}_{i-1}) \quad \dots\dots(17)$$

表 1 シミュレーション条件

Simulation No.	Diffusion ratio $\bar{F}$	Non-dimensional stress $\bar{\sigma}_\infty$
1	0.1	7
2	1	5
3	1	7
4	1	10
5	1	50
6	10	7
7	100	7
8	100	10
9	10000	3
10	10000	7
11	10000	10
12	10000	50

図 4 シミュレーションより得られた粒界溝形状の変化

より計算できる。ここで、計算精度を考慮して、全点において1ステップにおける変位増分 $\bar{v}_i \Delta\bar{t}$ が0.001以下となるように $\Delta\bar{t}$ を十分小さく設定した。溝先端の座標は $(\bar{x}'_{N-1} + \bar{y}'_{N-1}/\tan \psi, 0)$ とした。ここで得られた新座標をもとに上述の過程を繰返して成長過程を求めた。また、隣接点間隔が初期間隔の2倍を越える場合には、新たな点をその中央に導入した。なお、クリープキャビティ成長について同様の数値シミュレーションがNixらによって行われている⁽¹⁵⁾。

計算条件の詳細を表1に示す。ここでは、隣合う二つの粒界の間隔 $2L$ が配線幅 $2W$ に比べて十分大きい(線幅 $2W$ の10倍)場合について計算した。

3・2 シミュレーション結果および考察 図4はシミュレーションより得られた粒界溝成長による溝形状の変化を示す。式(12)の拡散比が大きい場合には(高 F 値)図(a)、高応力の場合には図(c)のように、溝は粒界に沿ってき裂状に成長している。これに対して、低 F 値かつ低応力条件下では、図(b)に示すようにThermal groovingに似た開口角の大きなV形の粒界溝となっている。応力や F 値は温度等のパッケージの製造条件や使用条件に敏感であるが、ストレス・マイグレーション破損配線の観察より、使用条件の違いによってき裂状あるいはV形の溝のいずれかが存在することが指摘されている⁽⁸⁾。なお、配線の応力は非

図 5 シミュレーションより得られた粒界溝の無次元化成長曲線

図6 シミュレーションより得られた粒界溝の無次元化成長速度

常に高い場合があることが報告されており⁽⁸⁾、通常の金属材料では F 値は 100 以下であることを考え合わせると、配線に現れるき裂状の溝成長には応力の寄与が大きいと考えられる。

図5と図6は粒界溝の成長曲線と成長速度である。いずれの条件においても、粒界溝は初期には高速成長を示すものの、成長とともに減速する。しかし、後期には断面減少による真応力増加のために再び成長が加速される。また、応力および F 値が大きいほど溝成長は速く、応力に誘起された粒界拡散により著しく成長が加速されることがわかる。図6中の破線は無応力条件下の溝成長速度であり、粒界溝深さ a の時間に対する変化の解析解⁽¹²⁾、

$$a = 0.7803 \cdot \tan(\pi/2 - \psi) (D_s \delta_s \Omega \gamma_s t / kT)^{1/4} \quad \dots\dots\dots (18)$$

の時間微分として得られるものである。ここで、 t は高温にさらされた時間であり、 a は初期表面位置より測定した溝深さである。応力が負荷された場合(実線)でも、ごく初期の成長挙動は破線と一致する傾向がある。すなわち、粒界拡散がかなり活発な条件においても、溝発生および初期成長は表面拡散に支配されていることがわかる。図4(a)と(c)を詳細にみると、粒界拡散が活発な条件にもかかわらず初期にはV形に近い溝形状となっており、表面拡散が溝発生・成長を律

図7 シミュレーションより得られたアルミニウム配線の無次元化寿命

速していることを示している。

図7は、シミュレーションより求められた配線の破損寿命を示す。ここで、配線の破損寿命には粒界溝が配線を横断する破断時間 t_r をとっている。粒界拡散が活発となる条件ほど破損寿命は短い。ここで、

$$2W = 1 \mu\text{m} \quad \dots\dots\dots (19\cdot a)$$

$$\gamma_s = 1.5 \text{ J/m}^2 \quad \dots\dots\dots (19\cdot b)$$

$$D_b \delta_b = 2.64 \times 10^{-23} \text{ m}^3/\text{s} \quad \dots\dots\dots (19\cdot c)$$

$$\Omega = 1.66 \times 10^{-29} \text{ m}^3 \quad \dots\dots\dots (19\cdot d)$$

$$T = 473 \text{ K} \quad \dots\dots\dots (19\cdot e)$$

$$F=100 \dots\dots\dots (19\cdot f)$$

$$\Sigma=7 \text{ (約 21 MPa)} \dots\dots\dots (19\cdot g)$$

と設定すると、本シミュレーションより求められる破損寿命は約 24 時間となり、粒界溝成長が現実的に大きな影響を及ぼすことが明らかである。ただし、本モデルでは粒界溝成長に伴う応力緩和の効果を考慮しておらず、上記の温度等は高めに設定しているため、実際の破損寿命はこれより長くなると考えられる。ただし、薄膜配線では応力や F 値は製造条件や使用条件のみならず局所の微視構造に強く依存するため、配線の部分によって大きく異なることが予想される。現時点では、これらの値については正確に求められていない。また、現実の配線は三軸応力下にあるため、これが拡散に及ぼす影響を明らかにする必要がある。さらに、配線長さ(粒界数)を考慮した最弱部分の信頼性解析も重要になるであろう。

さて、式(13・a)より本機構による破損時間は配線幅の 4 乗に比例することがわかる。したがって、配線幅が 100 μm の場合には破損時間は 1 μm の場合の 10^8 倍となって、現実的には問題とならない。逆に、1 μm を割ると、寿命は急速に短くなる。すなわち、本機構はサブミクロンの微小部材に特有の破壊機構である。

4. 結 言

電子パッケージ内アルミ配線の主要な破損原因のひとつであるストレス・マイグレーションによる破壊機構について検討した。また、その破損過程の数値シミュレーション方法を行った。得られた主な結果を以下に要約する。

(1) アルミ配線のストレス・マイグレーション破壊機構として、表面拡散と粒界拡散の競合による粒界溝の成長モデルを提案した。

(2) 粒界溝の発生および初期成長は表面拡散が支配的である。

(3) 粒界溝成長は、垂直引張応力に誘起された粒界拡散により著しく加速される。

(4) 粒界拡散が表面拡散より活発な条件下では、き裂状の粒界溝が形成され、逆の場合には溝は開口の

大きな V 形に成長する。また、粒界拡散が活発である条件(高 F 値、高応力)ほど、溝成長速度は速く、配線の寿命は短い。

(5) 本研究で提案した粒界溝成長は 1 μm 以下の微小要素特有の高温破壊機構であり、その影響は線幅寸法の 4 乗に反比例する形で急速に大きくなる。

最後に、本研究は平成 3 年度文部省科学研究費補助金総合研究(A)(研究代表者 東北大学工学部・阿部博之教授)によって実施した。また、図 1 の写真は(株)東芝研究開発センター機械・エネルギー研究所・川上崇氏より提供を受けた。さらに、同氏には本研究に関する電子パッケージ製造・使用上の問題点をお教えいただいた。合わせて謝意を表する。

文 献

- (1) Klema, J., Pyle, R. and Domangue, E., *Proc. Int. Reliability Physics Symp.*, (1984), 1.
- (2) Curry, J., Fitzgibbon, G., Guan, Y., Muollo, R., Nelson, G. and Thomas, A., *Proc. Int. Reliability Physics Symp.*, (1984)6.
- (3) Kudou, H., Sawada, K. and Izumi, H., *Advances in Electronic Packaging 1992, Proc. of the 1992 Joint ASME/JSME conference on Electronic Packaging, Am. Soc. Mech. Eng.*, (1992), 713.
- (4) Borgesen, P., Korhonen, M. A., Basa, C., LaFontaine, W. R., Land, B. and Li, C.-Y. *Materials Reliability Issues in Microelectronics, Material Research Society Symp. Proc.*, 225(1991), 143, 161.
- (5) Lloyd, J. R. and Arzt, E., *Materials Reliability in Microelectronics II, M. R. S. S. P.*, 265(1992), 45.
- (6) 安食監修, 半導体デバイスの信頼性技術, (1988), 208, 日科技連刊.
- (7) 日野出, 日本金属学会会報, 28-1(1989), 40.
- (8) 岡林, 応用物理, 59-11(1990), 1461.
- (9) 手崎・金子・蓮沼, *Nikkei Microdevices*, (19905), 93.
- (10) たとえば, Shewmon, P. G., *Diffusion in Solids*, (1963), McGraw-Hill.
- (11) Herring, C., *J. Appl. Phys.*, 21(1950)437.
- (12) Mullins, W. W., *J. Appl. Phys.*, 28(1957), 333.
- (13) Hull, D. and Rimmer, D. E., *Philos. Mag.*, 4(1954), 673.
- (14) Chuang, T., Kagawa, K. I., Rice, J. R. and Sills, L. B., *Acta Met.*, 27(1979), 265.
- (15) Martinez, L. and Nix, W. D., *Met. Trans.*, A, 13(1982), 427.
- (16) Evans, H. E., *Mechanics of Creep Fracture*, (1984), Elsevier.
- (17) Raj, R., *Acta Met.*, 26(1978), 995.